3.4 단순 조화 떨개 (Simple Harmonic Oscillator)

• **고유상태와 고유값**

용수철에 매달려 진동하는 물체는 단순 조화 떨개의 대표적인 예라고 할 수 있는데, 이때 물체의 운동은 물체의 질량 m과 용수철 상수 k에 의해 그 특성이 결정된다. 이 경우 물체의 위치에너지 V는 평형상태로부터 물체의 변위를 x라고 하면 $V=\frac{1}{2}kx^2$ 으로 주어진다. 그러므로 전체에너지에 해당하는 하밀토니안은 운동에너지와 위치에너지의 합으로 다음과 같이 주어진다.

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2 .$$

고전적으로 용수철에 매달린 물체의 진동수 w는 $w=\sqrt{\frac{k}{m}}$ 으로 주어지므로, 하밀토니안은 진동수 w로 다음과 같이 쓸 수도 있다.

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}mw^2x^2$$

양자역학적으로 위치 x와 운동량 p는 항상 하이젠베르크의 기본 교환관계 $[x,p]=i\hbar$ 를 만족하므로, 우리는 다음 관계를 만족하는 연산자 $a, a^\dagger$를 x 와 p 로써 다음과 같이 정의하고자 한다: $[a,a^\dagger]=1$, $a:=Cx+Dp$, $a^\dagger:=C^*x+D^*p$, 여기서 $C, D\in\mathbb{C}$ 인 상수.
이는 $[a,a^\dagger]=[Cx+Dp, C^*x+D^*p]=CD^*[x,p]+DC^*[p,x]=-2\hbar\,\mathrm{Im}(CD^*)=1$ 이 만족되어야 함을 의미한다.
한편, 단순 조화 떨개에 대한 슈뢰딩거 방정식 $H\psi=E\psi$ 은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}mw^2x^2\psi=E\psi .$$

양변에 $-\frac{1}{\hbar w}$ 를 곱하고, 새 변수 $y\equiv\alpha x$, $\alpha\equiv\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}$ 로 고쳐 쓰면 위식은 다음과 같다.

$$\frac{d^2\psi}{dy^2}-y^2\psi+\frac{2E}{\hbar w}\psi=0$$

이제 α를 도입하여 방정식이 간단해 졌으므로 $C:=\frac{\alpha}{\sqrt{2}}$ 로 놓으면, $-2\hbar\,\mathrm{Im}(CD^*)=1$ 를 만족하려면 $D=\frac{i}{\sqrt{2}\hbar\alpha}$ 이면 된다. 즉, $a:=\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x+\frac{i}{mw}p\right)$, $a^\dagger:=\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x-\frac{i}{mw}p\right)$ 로 정의하면 $[a,a^\dagger]=1$ 의 관계식이 성립한다. 이제 x 와 p를 $a, a^\dagger$로 다시 쓰면, $x=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a+a^\dagger)$, $p=-\frac{mwi}{\sqrt{2}\alpha}(a-a^\dagger)$ 로 주어진다. 이 관계식을 사용하면

$$x^2=\frac{1}{2\alpha^2}[a^2+a^\dagger a+aa^\dagger+(a^\dagger)^2],\quad p^2=-\frac{mw^2}{2\alpha^2}[a^2-a^\dagger a-aa^\dagger+(a^\dagger)^2]$$ 이 되어

$\alpha=\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}$ 을 대입하면 하밀토니안은 $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}mw^2x^2=\frac{\hbar w}{2}(a^\dagger a+aa^\dagger)$ 로 주

어진다. 여기서 $[a, a^\dagger] = 1$, 즉 $aa^\dagger = 1 - aa^\dagger$ 의 관계식을 적용하면, 하밀토니안은 $a, a^\dagger$ 들로 최종적으로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$H = \hbar w\,(a^\dagger a + \frac{1}{2})\ .$$

이제 우리는 수 연산자(number operator)를 $N \equiv a^\dagger a$ 로 정의하고, 이의 고유상태 ϕ_n 이 고유값 n 을 갖는다고 가정한다.

$$N\phi_n := n\phi_n\ .$$

그러면 하밀토니안은 수 연산자로 다음과 같이 표현되므로,

$$H = \hbar w\,(N + \frac{1}{2})\ ,$$

수 연산자의 고유상태 ϕ_n 은 하밀토니안의 고유상태가 되고, 하밀토니안의 고유값은 $\hbar w\,(n + \frac{1}{2})$ 이 됨을 알 수 있다. 즉, 단순 조화 떨개의 에너지는 $E = \hbar w\,(n + \frac{1}{2})$ 로 주어진다. 하지만 아직까지 우리는 에너지를 결정하는 고유값 n에 대한 어떠한 정보도 갖고 있지 않다. 이제 우리는 수 연산자의 고유값 n 에 대한 정보를 얻기 위하여 수 연산자의 고유상태 ϕ_n 에 a와 $a^\dagger$를 작용시키면 어떻게 되는지 살펴보겠다. 이를 위해서 $a, a^\dagger$ 와 N 사이의 교환관계들을 알아보자. 먼저 $[N, a] = [a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a]a = -a$ 가 됨을 알 수 있다. 위에서 우리는 연산자 교환관계식 $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ 및 $[A, A] = 0$ 을 사용하였다. 다시 동일한 방법으로 $[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] = a^\dagger$ 가 된다. 이제 이 두 연산자 관계식들을 고유상태 ϕ_n 에 적용해 보겠다.

먼저, $[N, a^\dagger]\phi_n = Na^\dagger\phi_n - a^\dagger N\phi_n = a^\dagger\phi_n$ 는 관계식 $Na^\dagger\phi_n = (n+1)a^\dagger\phi_n$ 을 준다. 여기서 우리는 앞에서 정의한 수 연산자의 고유상태 관계식 $N\phi_n := n\phi_n$ 을 사용하였고, 다시 이 관계식으로부터 $a^\dagger\phi_n$ 이 고유값 $n+1$ 을 갖는 수 연산자 N의 고유상태라는 것을 알 수 있다. 즉, $a^\dagger\phi_n \sim \phi_{n+1}$ 이 되고 여기서 비례상수를 c_n^+ 로 쓰면, $a^\dagger\phi_n = c_n^+\phi_{n+1}$ 로 쓸 수 있다. 비례상수 c_n^+ 는 나중에 구하기로 하겠다.

마찬가지로 $[N, a]\phi_n = Na\phi_n - aN\phi_n = -a\phi_n$ 는 관계식 $Na\phi_n = (n-1)a\phi_n$ 을 주고, 이로부터 $a\phi_n$ 이 고유값 $n-1$ 을 갖는 수 연산자 N의 고유상태라는 것을 알 수 있다. 즉, $a\phi_n \sim \phi_{n-1}$ 이 되므로 이때 비례상수를 c_n^- 로 쓰면, $a\phi_n = c_n^-\phi_{n-1}$ 로 쓸 수 있다. 이제 우리는 연산자 a와 $a^\dagger$가 각각 수 연산자 N 의 고유상태(하밀토니안의 고유상태이기도 함) ϕ_n 을 한 단계 내리거나 올리는 역할을 함을 알았다. 그래서 a와 $a^\dagger$는 각각 내림 연산자(lowering operator)와 올림 연산자(raising operator)로 불린다. 이제는 두 비례상수 c_n^+ 과 c_n^- 을 구해보기로 하자. 여기서 우리는 a와 $a^\dagger$에 대하여 앞에서 정의한 두 관계식 $a := \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\,(x + \frac{i}{mw}p)$, $a^\dagger := \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\,(x - \frac{i}{mw}p)$ 에서 x 와 p가 각각 자체수반 연산자 $(x = x^\dagger,\ p = p^\dagger)$ 임을 주목하자. 이는 $a^\dagger$는 a의 수반 연산자 ($(a)^\dagger = a^\dagger$)임을 보여준다. 이제 비례상수 c_n^-을 구하기 위하여 다음의 내적을 생각해 보자.

$< a\phi_n \mid a\phi_n > \; = \; < c_n^- \phi_{n-1} \mid c_n^- \phi_{n-1} > \; = (c_n^-)^* c_n^- < \phi_{n-1} \mid \phi_{n-1} > \; = \; \mid c_n^- \mid^2$.
여기서 수반 연산자의 정의를 사용하면 위식은 다음과 같이 쓸 수 있으므로,
$< a\phi_n \mid a\phi_n > \; = \; < \phi_n \mid a^\dagger a\phi_n > \; = \; < \phi_n \mid N\phi_n > \; = n < \phi_n \mid \phi_n > \; = n$ 이 된다.
즉, $c_n^- = \sqrt{n}$ 이 되어 우리는 다음 관계식을 얻는다.

$$a\,\phi_n = \sqrt{n}\,\phi_{n-1}$$

우리는 c_n^+ 의 경우에도 동일한 방식으로 구할 수 있다.
$< a^\dagger\phi_n \mid a^\dagger\phi_n > \; = \; < c_n^+ \phi_{n+1} \mid c_n^+ \phi_{n+1} > \; = \; (c_n^+)^* c_n^+ < \phi_{n+1} \mid \phi_{n+1} > \; = \; \mid c_n^+ \mid^2$.
다시 수반연산자의 정의를 사용하면 위식은 다음과 같이 쓸 수 있으므로,
$< a^\dagger\phi_n \mid a^\dagger\phi_n > \; = \; < \phi_n \mid a\,a^\dagger\phi_n > \; = \; < \phi_n \mid (a^\dagger a + 1)\phi_n > \; = n+1$ 이 된다.
즉, $c_n^+ = \sqrt{n+1}$ 이 되어 다음 관계식을 얻는다.

$$a^\dagger\phi_n = \sqrt{n+1}\;\phi_{n+1}$$

위에서 우리는 규격화 조건식 $< \phi_m \mid \phi_m > \; := 1$ 과 교환 관계식 $[a, a^\dagger] = 1$ 을 사용하였다.
이제 에너지의 고유값에 대하여 알아보기 위하여 하밀토니안의 기댓값을 생각해보자. 일단 임의의 상태 $\mid \psi >$ 에 대한 하밀토니안의 기댓값은 항상 영보다 크거나 같다: $< H >_\psi \geq 0$.
이는 자기수반 연산자의 제곱의 기댓값은 항상 영보다 크거나 같다는 것에서 나온다.
즉, $A = A^\dagger$ 이면, $< A^2 >_\psi \; = \; < \psi \mid A^2\psi > \; = \; < A^\dagger\psi \mid A\psi > \; = \; < A\psi \mid A\psi > \; \geq 0$ 이 된다. 여기서 $H = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{1}{2} m w^2 x^2$ 로 주어지는 하밀토니안은 자기수반 연산자인 x 와 p 의 제곱 항들로만 구성되어 있고 각항의 계수는 양수이므로 하밀토니안의 기댓값은 영보다 크거나 같다. 한편, 앞에서 고유상태 ϕ_n 의 경우 $H\phi_n = \hbar w\,(n + \dfrac{1}{2})\,\phi_n$ 의 관계를 만족하므로, 이때 하밀토니안의 기댓값은 $< H >_{\phi_n} = \; < \phi_n \mid H \mid \phi_n > \; = \hbar w\,(n + \dfrac{1}{2})$ 이 된다.
이는 곧 수 연산자의 고유값 n 에 대한 조건식 $n + \dfrac{1}{2} \geq 0$ 을 준다. 그런데 위에서 구한 관계식 $a\,\phi_n \sim \phi_{n-1}$ 을 사용하여 고유상태에 내림 연산자를 거듭하여 작용시킨다면 고유값 n 은 계속 줄어들게 될 것이다. 그러나 $n + \dfrac{1}{2} \geq 0$ 이라는 조건은 항상 충족되어야 하므로 어떤 특정한 고유상태에 가서는 내림 연산자를 작용시키면 영이 되어야 한다. 즉 어떤 특정한 상태 ϕ_v 에 도달하였을 때 $a\,\phi_v = 0$ 이 되어야 한다. 이는 $v = 0$ 일 때 가능하다.
즉, $a\,\phi_n = \sqrt{n}\,\phi_{n-1}$ 에서 $n = 0$ 이 되면 $a\,\phi_0 = 0$ 이 되기 때문이다. 우리는 이 고유상태 ϕ_0 을 바닥상태(ground state)라고 부르며 이때 에너지는 최소값 $E_0 = \dfrac{1}{2}\hbar w$ 를 갖는다.

이상은 진동수가 $w\ (= \sqrt{\dfrac{k}{m}})$ 인 단순 조화 떨개의 에너지가 다음과 같은 값을 가짐을 보여준다: $E_n = \hbar w (n + \dfrac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, 3, \cdots$.

- **고유상태 ϕ_n 의 함수 표현**

위에서 우리는 고유상태 ϕ_n 에 올림 연산자를 작용시키면 $a^\dagger \phi_n = \sqrt{n+1}\ \phi_{n+1}$ 로 한 단계 올라감을 보았다. 이제 바닥상태 ϕ_0 에 올림연산자를 작용시키면 $a^\dagger \phi_0 = \phi_1$ 이 되고, 다시 작용시키면 $a^\dagger \phi_1 = \sqrt{2}\ \phi_2$, 즉 $\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger \phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2!}} (a^\dagger)^2 \phi_0$ 된다. 다시 한번 작용시키면 $a^\dagger \phi_2 = \sqrt{3}\ \phi_3$ 에서 $\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{3!}} (a^\dagger)^3 \phi_0$ 가 된다. 이를 반복하면, n 번째 고유상태 ϕ_n 은 다음과 같이 바닥상태로부터 구할 수 있다.

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \phi_0, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

한편, 바닥상태는 $a\,\phi_0 = 0$ 의 관계식을 만족하므로 이를 x 와 p 로 다시 쓰면 다음과 같다.

$$a\,\phi_0 = \frac{\alpha}{2}\left(x + \frac{i}{mw} p\right)\phi_0 = 0$$

이를 위치 표현으로 다시 쓰면, $\frac{\alpha}{2}\left(x + \frac{i}{mw}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\phi_0(x) = 0$ 의 미분방정식이 된다. 이는 정리하면 $\frac{d\,\phi_0(x)}{dx} + \alpha^2 x\,\phi_0(x) = 0$ 가 되어, 그 해가 다음과 같음을 알 수 있다.

$$\phi_0(x) = C_N \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right),\ C_N \text{은 규격화 상수},\ \alpha = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\,.$$

여기서 규격화 조건식 $\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\ \phi_0(x)\ |^2 = 1$ 에 $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-bx^2) = \sqrt{\frac{\pi}{b}}$ 을 적용하면,

$|\ C_N\ |^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} = 1$ 이 되어 $C_N = \sqrt{\alpha}\pi^{-\frac{1}{4}} = \left((\frac{mw}{\hbar})/\pi\right)^{\frac{1}{4}}$ 로 주어짐을 알 수 있다.

한편, $n \geq 1$ 인 고유상태들을 구하기 위하여 $a^\dagger$ 를 x 와 p 로 표현하여 보자.

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger \phi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{\alpha}{2}\left(x - \frac{i}{mw}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\phi_{n-1}(x)\ ,\ n = 1, 2, 3, \cdots$$

여기서 $\alpha x = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\,x \equiv y$ 로 놓으면, 위식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(y - \frac{d}{dy}\right)\phi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2^n}}\left(y - \frac{d}{dy}\right)^n \phi_0\ .$$

여기서 $\phi_0 \sim \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$ 이므로, $\left(y - \frac{d}{dy}\right)^n \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \equiv H_n(y)\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$ 로 정의하면, $H_n(y)$ 는 y 의 다항식으로 주어진다. 이 다항식을 우리는 에르미트 다항식(Hermite polynomial)이라고 부르며, 통상 다음과 같이 표현한다.

$$H_n(y) = (-1)^n \exp(y^2)\left[\left(\frac{d}{dy}\right)^n \exp(-y^2)\right]$$

위 표현은 $\exp\left(\frac{y^2}{2}\right)\left[\left(\frac{d}{dy}\right)^n \exp(-y^2)\right] = \left(\frac{d}{dy} - y\right)^n \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$ 라는 항등관계를 적

용하면 처음의 정의식과 같음을 알 수 있다.

이제 n 번째 고유상태 ϕ_n 을 y 의 함수로 나타내고, 에르미트 다항식을 써서 표현하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\phi_n(y) = A_n H_n(y) \exp(-\frac{y^2}{2}), \quad A_n \text{ 은 규격화 상수.}$$

이 규격화 상수는 위에서 주어진 정의식 $(y - \frac{d}{dy})^n \exp(-\frac{y^2}{2}) \equiv H_n(y) \exp(-\frac{y^2}{2})$ 과

$\phi_0(y) = \pi^{-\frac{1}{4}} \exp(-\frac{y^2}{2})$ 를 (참고로 이 표현은 규격화 조건 $\int_{-\infty}^{\infty} dy \, |\phi_0(y)|^2 = 1$ 을 만족함) 위에 주어진 ϕ_n 의 표현식 $\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} (y - \frac{d}{dy})^n \phi_0$ 에 대입하여 비교하면 얻을 수 있다.

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} (y - \frac{d}{dy})^n \left(\pi^{-\frac{1}{4}} \exp(-\frac{y^2}{2}) \right) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(y) \exp(-\frac{y^2}{2})$$

그러므로 규격화 상수는 $A_n = 1/\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}$ 로 주어진다. 다시 말하면 에르미트 다항식은 규격화 조건식 $\int_{-\infty}^{\infty} dy \, |\phi_n(y)|^2 = 1$ 로부터 다음과 같이 규격화되어야 한다.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-y^2) \, |H_n(y)|^2 = 2^n n! \sqrt{\pi} \; .$$

그리고 이러한 에르미트 다항식은 다음과 같이 주어진 에르미트 방정식을 만족한다.

$$(\frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} + 2n) H_n(y) = 0$$

한편, 우리는 위에 정의된 에르미트 방정식을 앞에서 얻은 단순 조화 떨개의 슈뢰딩거 방정식으로부터도 끌어낼 수 있다. 이 절의 맨 앞에서 우리는 새로운 변수 $y \equiv \alpha x$ 로 슈뢰딩거 방정식을 고쳐 쓰면 다음과 같음을 보았다: $\frac{d^2\psi}{dy^2} - y^2\psi + \frac{2E}{\hbar w}\psi = 0$.

여기서 단순 조화 떨개가 고유상태 ϕ_n 에 있다면, 위 방정식은 $E = \hbar w (n + \frac{1}{2})$을 대입하면 다음과 같아진다.

$$\frac{d^2\phi_n}{dy^2} - y^2 \phi_n + (2n+1)\phi_n = 0$$

이제 고유상태를 $\phi_n \sim H(y) \exp(-\frac{y^2}{2})$ 로 표현하여 위식에 대입하면, 우리는 $H(y)$ 가 위에서 주어진 에르미트 방정식을 만족함을 바로 볼 수 있다. 즉 $H(y) \sim H_n(y)$ 임을 알 수 있다.

► 에르미트 다항식: 에르미트 방정식의 해 – 증명 ◄

위에서 우리는 $H_n(y) = (-1)^n \exp(y^2)\,[\,(\frac{d}{dy})^n \exp(-y^2)\,]$ 으로 정의된 에르미트 다항식이 에르미트 방정식 $(\frac{d^2}{dy^2} - 2y\frac{d}{dy} + 2n)\,H_n(y) = 0$ 의 해라고 하였다. 이를 증명하여 보도록 하자.

이제 $D \equiv \frac{d}{dy}$ 로 표현하면, 위식은 $(D^2 - 2yD + 2n)[e^{y^2} D^n e^{-y^2}] = 0$ 으로 표현된다.

그리고 이는 다시 $e^{y^2}[D^{n+2} + 2yD^{n+1} + (2n+2)D^n]\,e^{-y^2} = 0$ 로 쓸 수 있다.

여기서 우리는 대괄호 안의 첫 항을 다음과 같이 표현하도록 하겠다.

$$D^{n+2} e^{-y^2} = D^n\,(D^2 e^{-y^2}) = D^n(-2e^{-y^2} - 2yDe^{-y^2})$$

여기서 두 번째 항은 다음과 같이 표현할 수 있음에 주목하자.

$$-D^n(2yDe^{-y^2}) = -2yD^{n+1}e^{-y^2} - 2n(Dy)D^n e^{-y^2}$$

이들 모두를 대괄호 안에 대입하면 주어진 식은 다음과 같이 된다.

$$[D^{n+2} + 2yD^{n+1} + (2n+2)D^n]\,e^{-y^2}$$
$$= -2D^n e^{-y^2} - 2yD^{n+1}e^{-y^2} - 2nD^n e^{-y^2} + 2yD^{n+1}e^{-y^2} + (2n+2)D^n e^{-y^2}$$
$$= 0$$

즉, 이는 에르미트 다항식이 에르미트 방정식을 만족함을 보여준다.